

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 538.911; 548.4; 620.186; 621.762.3

DOI: 10.17223/00213411/65/8/136

ИЗУЧЕНИЕ КРИВИЗНЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ
НА ОСНОВЕ ДИСКРЕТНОГО ВЕКТОРНОГО ПОЛЯ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ*

И.И. Суханов

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия

Ключевые слова: кривизна кристаллической решетки, векторные поля, методы машинного обучения, полиномиальная регрессия, кригинг.

На сегодняшний день одной из наиболее актуальных задач современного материаловедения является изучение неравновесных наноструктурных состояний в металлических материалах. К настоящему времени накоплено достаточное количество работ, посвященных экспериментальным исследованиям таких высокодефектных состояний [1]. Несмотря на это в рамках теоретических и модельных представлений пока не существует единой концепции их описания. Одним из способов изучения формирования и эволюции таких состояний на различных масштабных уровнях является компьютерное моделирование методом молекулярной динамики [2]. Зачастую для повышения физической интерпретируемости результатов молекулярно-динамического моделирования требуется проводить постобработку результатов с целью дальнейшего сравнительного анализа с экспериментально наблюдаемыми величинами. Удобным инструментом для такой постобработки являются методы машинного обучения, которые в числе основных преимуществ обладают высокой «гибкостью» и относительно простой адаптацией при сохранении приемлемого уровня точности прогнозирования результатов. Благодаря такому подходу можно провести поиск и анализ целевых величин, которые описывают важнейшие физические свойства реальных систем. В настоящей работе в качестве такой величины была выбрана ориентированная кривизна векторного поля атомных смещений. Интерес к анализу этой величины основан на ее тесной связи с тензором изгиба-кручения кристаллической решетки и, следовательно, с силовыми и энергетическими характеристиками дефектной субструктуры [3].

В настоящей работе с использованием методов машинного обучения проведены теоретические оценки кривизны кристаллической решетки неравновесных наноструктурных состояний по дискретному полю смещений атомов в процессе моделируемого деформационного воздействия.

Исследуемый массив данных представляет собой набор координат узловых точек среды $[x_i, y_i]$, а также компонент их перемещений $[u_{xi}, u_{yi}]$, инициируемых деформационным воздействием на систему. Таким образом, мы получаем согласованный массив данных, описывающий дискретное векторное поле $V(x, y) = (F_x(x, y), F_y(x, y))^T$. Процедуру «заполнения» (определения в каждой точке континуума) можно реализовать с помощью метода полиномиальной регрессии [4]. Это один из основных методов машинного обучения с учителем (Supervised learning), целью которого является восстановление зависимости между данными по заданной обучающей выборке путем минимизации функции потерь. В частности, в настоящей работе эта задача заключалась в минимизации функции среднеквадратичной ошибки (MSE) в виде

$$\left(\sum_{q=0}^n \sum_{r=0}^n a_{qr} x^q y^r - u \right)^2 \Big|_{\min(a_{qr})} \rightarrow F(x, y). \quad (1)$$

Здесь a_{qr} – весовые коэффициенты полиномиальной регрессии. Процедура минимизации была проведена для каждой компоненты векторного поля V с использованием библиотеки Numerical Algorithms Group (NAG). В рамках такого подхода обеспечивается гладкость целевых функций, которые описывают векторные поля смещений атомов, вызванные малыми деформациями моделируемой среды. Следует отметить, что в случае анализа произвольных полей в условиях пластической деформации целевые функции могут быть недифференцируемыми, так как имеет место наличие сингулярных областей вблизи залегания дефектов. В этом случае процесс поиска оптимумов можно провести субградиентными методами [5].

* Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема FWRW-2021-0008.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>